



TITLE:

スピントリプレット超伝導  
Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>の理論(修士論文(2002年  
度))

AUTHOR(S):

焼山, まゆみ

---

CITATION:

焼山, まゆみ. スピントリプレット超伝導Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>の理論(修士論文  
(2002年度)). 物性研究 2003, 80(6): 900-932

ISSUE DATE:

2003-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/97593>

RIGHT:

修士論文 (2002年度)

# スピントリプレット超伝導 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ の理論

姫路工業大学大学院理学研究科  
物質科学専攻応用数学講座  
焼山まゆみ

## 目次

1	序論	901
2	$\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ の構造とフェルミ面	903
3	比熱	906
3.1	比熱	906
3.2	オーダーパラメータ	907
3.3	計算結果	908
4	帯磁率	909
4.1	形式化	910
4.2	計算結果	913
4.2.1	Case A	914
4.2.2	Case B	917
4.2.3	Case C	923
5	考察	924
6	謝辞	924
A	Appendix. A	925

# 1 序論

1986年の高温超伝導の発見以来、この発現機構を解明するために、関連物質についての研究が盛んに行われてきた。今までに発見されている高温超伝導体は、銅(Cu)を含んでいるが、銅以外の元素を用いて、類似の超伝導体を作ること、並行して試みられてきた。そして、1994年に前野ら[1]により、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ の超伝導が発見された。 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ のトリプレット超伝導については、いくつかの解説がある[2, 3, 4, 5]。また、高温超伝導のことまで含めた固体の電子論の教科書として、ス波[6]が参考になる。

この $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ は、銅酸化物の高温超伝導体である $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ と同じ層状ペロブスカイト構造をしているが、銅(Cu)を含んでいない。高温超伝導体では、伝導面は $\text{CuO}_2$ 面であるが、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ では、 $\text{RuO}$ 面が担っている。このことが銅酸化物と $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ の物性の違いに影響しているもの、と考えられる。

Cuの電子配置は $3d^{10}4s^1$ である。銅酸化物の高温超伝導体において、 $\text{CuO}_2$ 面ではCuイオンは+2価をとり、 $3d^9$ となる。Oイオンは-2価をとる。つまり、 $\text{Cu}^{2+}$ は $3d$ 軌道に9個の電子を含む。固体中では、結晶場により5重に縮退した $3d$ 軌道の縮退が解ける。結果、 $d_{x^2-y^2}$ 軌道が最もエネルギーが高い軌道となる。 $\text{Cu}^{2+}$ は、 $d_{x^2-y^2}$ 軌道を一つの電子が占有し、スピン $\frac{1}{2}$ を持つ。このため、銅酸化物の高温超伝導体では、電子間の反強磁性的相互作用が支配的になっている。 $\text{La}_2\text{CuO}_4$ では、ハイゼンベルグモデルで記述できる反強磁性相が安定になる。反強磁性相にホールをドーピングすることによって、高い転移温度を持つ超伝導が現れた、と考えられており、現在も様々な研究が行われている。

一方、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ では、Ruイオンは+4価をとり、Oイオンは-2価をとる。Ruの電子配置は $4d^75s$ であるため、 $\text{Ru}^{4+}$ は $4d^4$ となり $4d$ 軌道に4個の電子を含む。結晶場によって、縮退は一部解け、 $\text{Ru}^{4+}$ イオンは縮退の残った $4d_{yz}$ 、 $4d_{zx}$ 軌道と、それらとほとんど縮退している $4d_{xy}$ 軌道に4個の電子を含んだ状態になる。よって、スピン揺らぎが重要となり、トリプレット(triplet)超伝導が実現している、と考えられる。 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ の超伝導転移温度 $T_c$ は1.5Kと低い、通常の超伝導とは違う性質を持つものとして、理論の面からも、実験の面からも活発に研究されている。

この物質は、類似の化合物 $\text{SrRuO}_3$ が強磁性体であることや、電子の有効質量が、液体 $^3\text{He}$ と同じように強磁性的スピン揺らぎ(パラマグノン)によって、重くなっていると考えられたことなどから、当初からトリプレット超伝導の可能性が指摘されていた[7]。

そして、核磁気共鳴(Nuclear Magnetic Resonance:NMR)のナイトシフト(Knight Shift)[8]や、スピン分極した中性子を用いた弾性中性子散乱実験(neutron scattering experiment)[9]で得られるスピン帯磁率 $\chi^0(\mathbf{q}=0, \omega=0)$ が、磁場を伝導面に平行に加えた場合、 $T_c$ の前後で変化しないことから、トリプ

レット超伝導であることが明らかになった。もしシングレット (singlet) 超伝導であれば、クーパー対は全スピン  $S = 0$  の対であるから、磁場をどの方向にかけても  $T \rightarrow 0$  での帯磁率は 0 となるはずである。しかし、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  では、 $T_c$  以下でも帯磁率が 0 とならない磁場の方向があるということは、スピン帯磁率が異方性を持っていることにほかならず、トリプレット超伝導であるという証拠といえる。伝導面に平行な磁場でスピン帯磁率が  $T_c$  前後で変化しないことから、 $\mathbf{d}$  ベクトルが  $z$  方向 (伝導面に垂直な方向) を向いていることが結論される。ここで、 $\mathbf{d}$  ベクトルは、スピントリプレット超伝導のオーダーパラメータで、

$$\langle c_{\mathbf{k}\alpha} c_{-\mathbf{k}\beta} \rangle_{\alpha\beta} = (i(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sigma^y)_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} -d_x + id_y & d_z \\ d_z & d_x - id_y \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

で与えられる [10, 11]。

この物質以外には、 $^3\text{He}$  の超流動 [10] と  $\text{UPt}_3$  [12] で、トリプレット超伝導であることが確認されている。そのほかにも、 $\text{UGe}_2$  [13] や  $\text{URhGe}$  [14]、擬 1 次元有機導体  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$  [15] もトリプレット超伝導ではないか、ということで研究が進められている。従来の超伝導体はもちろん、同じ構造をしている銅酸化物の高温超伝導体でも、シングレット超伝導体であるため、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  は従来の超伝導体と異なった発現機構を持つものとして、注目を集めている。

さらに、ミューオンスピン緩和率 (muon Spin Relaxation:  $\mu\text{SR}$ ) の実験 [16] から、超伝導状態で、時間反転対称性 (time-reversal symmetry) を破ることも指摘されている。この実験は、磁気モーメントの方向が揃った正に帯電したミューオンを、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の単結晶に打ち込み、超伝導体内部にできた微弱な磁場によって、ミューオンの磁気モーメントの方向が変化する性質を利用して、局所内部磁場を観測するものである。その結果、 $T_c$  以下で自発的内部磁場が生じていることが分かり、時間反転対称性の破れが指摘されたのである。

また、核磁気緩和率  $T_1^{-1}$  や、比熱  $C$  [17]、熱伝導度 [18]、超音波吸収 [19] の温度依存性が、低温で温度  $T$  のべき乗に比例することから、フェルミ面のエネルギーギャップにラインノードがある、と考えられている。これらのことから、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  のオーダーパラメータを決めることは、トリプレット超伝導のメカニズムを知る手がかりの一つになる、と考えることができる。

最初  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の超伝導のオーダーパラメータは、 $^3\text{He}$  の類推から、 $k_x + ik_y$  という形をしているのではないか、という考えもあった [20, 21, 22]。しかし、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  のフェルミ面は  $z$  方向に開いた円筒形なので、エネルギーギャップが有限になり、この形のオーダーパラメータではラインノードを持つことはない。また  $f$  波の状態を考えて、オーダーパラメータが  $(k_x + ik_y)(k_x^2 - k_y^2)$  のような対称性を持っているとすると、ラインノードの存在と時間反転対称性の破れは説明することができる。しかし、この状態は  $k_x - ik_y$  と  $D_{4h}$  で同じ対称性

を持つので、 $(k_x + ik_y)(k_x^2 - k_y^2)$  というオーダーパラメータには、 $k_x - ik_y$  の形をした項が混ざってくることが考えられ、ラインノードが消失する可能性が大きい。

もし、何らかの理由で、 $(k_x + ik_y)(k_x^2 - k_y^2)$  のようなオーダーパラメータが実現していたとすると、 $k_x = \pm k_y$  の方向にラインノードが存在するはずである。つまり、磁場を  $x$ - $y$  面内で回転させて熱伝導度を測定すると、4 回対称性が期待される、ということである。実際、井澤らによって測定が行われたが、結果は予想されたものよりずっと小さな 4 回対称性しか示さなかった [23]。ここで現れた小さな 4 回対称性は、フェルミ面の形が 4 回対称性を持っていることによる上部臨界磁場  $H_{c2}$  の角度依存性から説明できるものであり、ラインノードによる 4 回対称性ではない、と考えられる。同じ実験の熱伝導度の磁場強度依存性から、ラインノードが存在することは明らかなので、これらの結果は、ラインノードがフェルミ面に対して、垂直ではなく水平に入っている [24]、ということをサポートする結果となっている。

しかし、ラインノード・オーダーパラメータの詳細については、実際にははっきりとした結論は出ていない。比熱などのバルクの測定では、ラインノードの有無は分かるが、どこに入っているかなどの情報は得られない。一方、中性子散乱実験から得られる動的スピン帯磁率  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  からは、ラインノードの詳細が分かる、と考えられている。超伝導状態での動的スピン帯磁率の結果が与えられれば、理論の結果と比較することにより、オーダーパラメータを決定することができるであろう。

またこの物質は化学的に安定しており、高純度の単結晶を作ることができる。そして、重い電子系の U 化合物などに比べ、電子構造が比較的単純である。そのため、この物質については多く研究されており、今後のトリプレット超伝導のメカニズムを知る有用な物質だと考えられている。

既に、スピントリプレット超伝導の動的スピン帯磁率を計算し、中性子散乱によりラインノードの詳細な情報が得られる可能性について、論文として発表している [25]。

## 2 Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> の構造とフェルミ面

Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> の構造図を図 1 に示す。層状ペロブスカイト構造で、Ru 原子と O 原子が同一平面状にあり、この RuO 平面が伝導面である。Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> のフェルミ面は、ド・ハースーフアン・アルフェン効果の実験 [26] などから、擬 2 次元円筒形をしていることが分かっている。またそのフェルミ面は  $\alpha$  面、 $\beta$  面、 $\gamma$  面と名づけられた 3 枚の面から成り、それぞれが、別々のエネルギーギャップを持っている、と考えられている。これはバンド計算の結果とも矛盾しない。

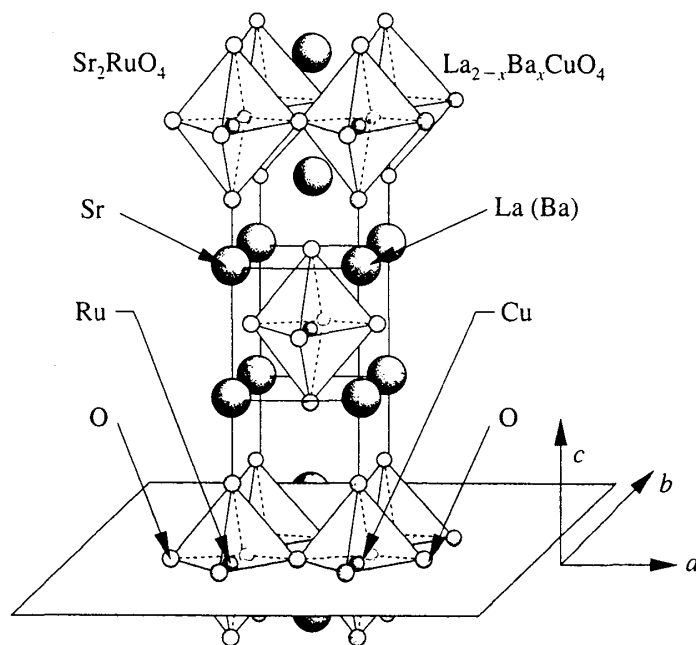


図 1:  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の構造図 [2]

今までに  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の超伝導について、多く理論計算がなされているので、それを紹介しておく。

Zhitomirsky と Rice[27] は、3枚のフェルミ面を  $\alpha$ 、 $\beta$  面と  $\gamma$  面の二つに分け、interband proximity effect を取り入れて、比熱の温度依存性などを計算している。彼らは、 $\gamma$  面を2次元的バンドとし、active band で full energy gap を持つ、と考え、 $\alpha$ 、 $\beta$  面を1次元的バンドとして、passive band で水平ラインノードが現れる、としている。

一方 Nomura と Yamada は、2次元3バンドハバードモデル (two-dimentional three-band Hubbard model) を相互作用の3次摂動まで取り入れて研究し、トリプレット超伝導は主に2次元バンドで安定化される、という結果を得た。彼らはまた、 $\beta$  バンドに垂直ノードが入ることによる比熱の温度依存性も計算した [28, 29]。

Sato と Kohmoto[31] は、反強磁性的 (AF) 揺らぎが異方的なときに、スピントリプレット超伝導が擬1次元的な  $\alpha$ 、 $\beta$  バンドで起こることを指摘している。Kuwabara と Ogata[32] も同様に、異方性の強い AF 揺らぎが支配的なときに、トリプレット超伝導が出現することを示した。彼らは、垂直ラインノードを想定している。また Takimoto[33] は、弱結合の縮退したハミルトニアンを用いて、on-site の相互作用と、別の軌道の相互作用を強くしていき、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  においてどのようなときにトリプレットが好まれるか計算した。

このように多くの研究がなされているが、ラインノードがフェルミ面に対し

てどのように入っているか、またどの面に入っているか、については、議論の渦中であり、まだ詳しいことは分かっていない。しかしこれが分かることで、トリプレット超伝導のメカニズムの解明の糸口になると考えられている。比熱やNMRなどのバルクの測定では、ラインノードの位置の詳細までは分からないが、中性子散乱などで見られる動的スピン帯磁率の虚部からは、詳しいことが分かるのではないかと期待されている。帯磁率の詳しいことについては、後の章で議論する。

我々は、Zhitomirsky らと同様に、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  では水平ラインノードが実現していると考え、研究を進めた。もし、酸素の  $p_\pi$  軌道と、ルテニウムの  $d_{xz}$  軌道からできるエネルギーバンドと、 $p_\pi$  軌道と  $d_{yz}$  軌道からできるエネルギーバンドのミキシングを考慮に入れると、 $\alpha$  バンドと  $\beta$  バンドを得る。しかし、そのミキシングが無視できるほど小さいならば、それらは2つの1次元バンドを作る。一方、ルテニウムの  $d_{xy}$  軌道と酸素の  $p_\pi$  軌道によって作られる  $\gamma$  面は2次元である。

よって、上記のことを考慮し、ミキシングを無視して、エネルギー分散を以下のように置いた。

$$\varepsilon_{1\mathbf{k}} = -2t_1 \cos(ak_x) + \varepsilon_{01} \quad (2.1)$$

$$\varepsilon_{2\mathbf{k}} = -2t_1 \cos(ak_y) + \varepsilon_{01} \quad (2.2)$$

$$\varepsilon_{3\mathbf{k}} = -2t_3(\cos(ak_x) + \cos(ak_y)) - 4t' \cos(ak_x) \cos(ak_y) + \varepsilon_{03} \quad (2.3)$$

この近似は実験で見えているフェルミ面をよく再現している、と考えることができる。これによるフェルミ面は図2に示す。この運動エネルギーを用いて、

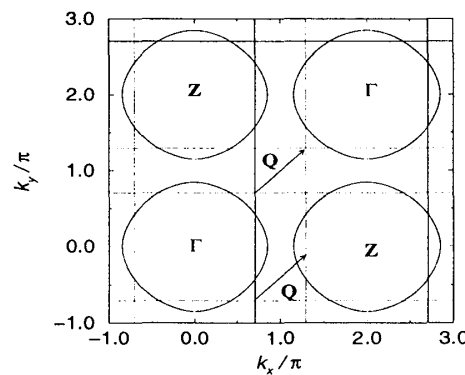


図 2: 近似したフェルミ面

種類の物理量を計算する。

### 3 比熱

#### 3.1 比熱

まず比熱の式を導出する。今は、フェルミ面を2つのバンドに分けた状態を考えているので、2バンド状態の比熱について記述する [34]。そのときのエントロピー  $S$  は

$$S = -2 \sum_{\ell\mathbf{k}} \{ (1 - f(E_{\ell\mathbf{k}})) \ln(1 - f(E_{\ell\mathbf{k}})) + f(E_{\ell\mathbf{k}}) \ln f(E_{\ell\mathbf{k}}) \} \quad (3.1)$$

と表すことができる。ここで、 $\ell$  は異なったバンドを表している。また、 $E_{\ell\mathbf{k}}$  はそれぞれのバンドの全エネルギーで、 $E_{\ell\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\ell\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\ell\mathbf{k}}|^2}$  である。比熱はエントロピーを使って、以下のように書ける。

$$C = T \frac{dS}{dT} \quad (3.2)$$

よって、2バンドの場合の比熱は式 (3.1) を使って、

$$\begin{aligned} C &= -2T \sum_{\mathbf{k}, \ell} \frac{df(E_{\ell\mathbf{k}})}{dT} \ln \left( \frac{f(E_{\ell\mathbf{k}})}{1 - f(E_{\ell\mathbf{k}})} \right) \\ &= -2T \sum_{\mathbf{k}, \ell} \frac{df(E_{\ell\mathbf{k}})}{dT} \ln \left( \frac{1}{e^{E_{\ell\mathbf{k}}/T} + 1} \frac{e^{E_{\ell\mathbf{k}}/T} + 1}{e^{E_{\ell\mathbf{k}}/T}} \right) \\ &= -2T \sum_{\mathbf{k}, \ell} \frac{df(E_{\ell\mathbf{k}})}{dT} \ln \left( \frac{1}{e^{E_{\ell\mathbf{k}}/T}} \right) \\ &= -2T \sum_{\mathbf{k}, \ell} \left( -\frac{E_{\ell\mathbf{k}}}{T} \right) \frac{df(E_{\ell\mathbf{k}})}{dT} \\ &= 2 \sum_{\mathbf{k}, \ell} E_{\ell\mathbf{k}} \frac{df(E_{\ell\mathbf{k}})}{dT} \end{aligned} \quad (3.3)$$

と書ける。また、

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{1}{k_B T} \\ \frac{d}{dT} &= -k_B \beta^2 \frac{d}{d\beta} \end{aligned}$$

を使って、式 (3.3) を書き直すと、

$$\begin{aligned} C &= 2 \sum_{\mathbf{k}, \ell} E_{\ell\mathbf{k}} \frac{df(E_{\ell\mathbf{k}})}{dT} \\ &= -2k_B \beta^2 \sum_{\mathbf{k}, \ell} E_{\ell\mathbf{k}} \frac{df(E_{\ell\mathbf{k}})}{d\beta} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 &= -2k_B\beta^2 \sum_{\mathbf{k},\ell} E_{\ell\mathbf{k}} \frac{df(E_{\ell\mathbf{k}})}{d(\beta E_{\ell\mathbf{k}})} \frac{\partial(\beta E_{\ell\mathbf{k}})}{\partial\beta} \\
 &= -2k_B\beta^2 \sum_{\mathbf{k},\ell} E_{\ell\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \frac{\partial f(E_{\ell\mathbf{k}})}{\partial E_{\ell\mathbf{k}}} (E_{\ell\mathbf{k}} + \beta \frac{\partial E_{\ell\mathbf{k}}}{\partial\beta}) \\
 &= -2k_B\beta \sum_{\mathbf{k},\ell} \frac{\partial f(E_{\ell\mathbf{k}})}{\partial E_{\ell\mathbf{k}}} (E_{\ell\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{2}\beta \frac{\partial E_{\ell\mathbf{k}}^2}{\partial\beta}) \\
 &= -2k_B\beta \sum_{\mathbf{k},\ell} \frac{\partial f(E_{\ell\mathbf{k}})}{\partial E_{\ell\mathbf{k}}} (E_{\ell\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{2}\beta \frac{\partial \Delta_{\mathbf{k}}^2}{\partial\beta}) \\
 &= -\frac{2}{T} \sum_{\mathbf{k},\ell} \frac{\partial f(E_{\ell\mathbf{k}})}{\partial E_{\ell\mathbf{k}}} (E_{\ell\mathbf{k}}^2 - \frac{1}{2k_B\beta} \frac{\partial \Delta_{\mathbf{k}}^2}{\partial T}) \\
 &= \sum_{\mathbf{k},\ell} \frac{2}{T^2} \frac{e^{E_{\ell\mathbf{k}}/T}}{(e^{E_{\ell\mathbf{k}}/T} + 1)^2} (E_{\ell\mathbf{k}}^2 - \frac{T}{2} \frac{\partial \Delta_{\mathbf{k}}^2}{\partial T}) \tag{3.4}
 \end{aligned}$$

となる。この式の $\Delta_{\mathbf{k},\ell}$ に次に求めるトリプレット状態のオーダーパラメータを入れることで、比熱の温度依存性が計算できる。

### 3.2 オーダーパラメータ

Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> のハミルトニアンは、以下のように置いた。

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\
 &= \sum_{\ell\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\ell\mathbf{k}} c_{\ell\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\ell\mathbf{k}\sigma} \\
 &\quad - g_{11} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma\sigma'} \{ (\sin k_x \sin k'_x + \sin k_y \sin k'_y) \\
 &\quad \times (c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\alpha\sigma'} c_{\mathbf{k}'\alpha\sigma'} + c_{\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}\beta\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\beta\sigma'} c_{\mathbf{k}'\beta\sigma'}) \} \\
 &\quad + g_{13} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma\sigma'} \left( \sin k_x \sin \frac{k'_x}{2} \cos \frac{k'_y}{2} \cos \frac{k'_z}{2} + \sin k_y \cos \frac{k'_x}{2} \sin \frac{k'_y}{2} \cos \frac{k'_z}{2} \right) \\
 &\quad \times (c_{\mathbf{k}\gamma\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}\gamma\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\alpha\sigma'} c_{\mathbf{k}'\alpha\sigma'} + c_{\mathbf{k}\gamma\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}\gamma\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\beta\sigma'} c_{\mathbf{k}'\beta\sigma'}) \\
 &\quad + c_{\mathbf{k}'\alpha\sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\alpha\sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{k}\gamma\sigma} c_{\mathbf{k}\gamma\sigma} + c_{\mathbf{k}'\beta\sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\beta\sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{k}\gamma\sigma} c_{\mathbf{k}\gamma\sigma}) \tag{3.5}
 \end{aligned}$$

ここで、 $\varepsilon_{\ell\mathbf{k}}$  は電子の運動エネルギー、 $c_{\ell\mathbf{k}\sigma}^{(\dagger)}$  ( $\ell = \alpha, \beta, \gamma$ ) は各バンドの消滅 (生成) 演算子である。 $g_{11}$  は、1次元バンド ( $\alpha, \beta$ ) の電子間引力のパラメータで、 $g_{13}$  は、1次元バンドと2次元バンド ( $\gamma$ ) 間のクーパーペアの飛び移り (hopping) の項を表すパラメータである。

シングレット超伝導の場合には、

$$c_{\mathbf{k}\alpha\uparrow}^\dagger = \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \alpha_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow} \tag{3.6}$$

$$c_{-\mathbf{k}\alpha\downarrow} = \cos \frac{\theta_{-\mathbf{k}}}{2} \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow} - \sin \frac{\theta_{-\mathbf{k}}}{2} \alpha_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \quad (3.7)$$

というボゴリューボフ変換でハミルトニアンが対角化される。スピントリプレットの場合も、ボゴリューボフ変換を少し拡張する必要があるが、同様に対角化することができる。ユニタリ状態と呼ばれる状態（トリプレットオーダーパラメータがユニタリ行列の定数倍で表される状態）のときは比較的簡単であり、 $\mathbf{d}$  ベクトルが  $z$  成分しか持たない場合には、シングレットの場合とほとんど同様にボゴリューボフ変換を行うことができる。ここで  $\alpha$  は  $\alpha$  バンドの生成消滅演算子であり、 $\beta$  バンド、 $\gamma$  バンドのときにはそれぞれ、 $\beta$ 、 $\gamma$  という生成消滅演算子を用いる。このボゴリューボフ変換を実行し、ハミルトニアンを対角化する。

そうして得られた2つのオーダーパラメータは以下の式の解として得られる。 $\delta_1$  は1次元バンドのオーダーパラメータ、 $\delta_3$  は2次元バンドのオーダーパラメータである。

$$\delta_1 = g_{11} \sum_{\mathbf{k}} \delta_1 \frac{\tanh\left(\frac{E_{1\mathbf{k}}}{2T}\right)}{2E_{1\mathbf{k}}} \sin^2 k_x + g_{13} \sum_{\mathbf{k}} \delta_3 \frac{\tanh\left(\frac{E_{3\mathbf{k}}}{2T}\right)}{2E_{3\mathbf{k}}} \sin^2 \frac{k_x}{2} \cos^2 \frac{k_y}{2} \cos^2 \frac{k_z}{2} \quad (3.8)$$

$$\delta_3 = g_{13} \sum_{\mathbf{k}} \delta_1 \frac{\tanh\left(\frac{E_{1\mathbf{k}}}{2T}\right)}{2E_{1\mathbf{k}}} \sin^2 k_x \quad (3.9)$$

このオーダーパラメータの導出はシングレットのときには Shul ら [34] によってなされており、Zhitomirsky-Rice[27] が使用しているものと同様である。ただし、どちらの場合も、フェルミ面上の状態密度は一定としているが、ここでの計算はそのような近似は用いず、波数  $\mathbf{k}$  についての和を数値的に行う。最近、Nagamatsu[35] らにより発見された超伝導  $\text{MgB}_2$  でも、2種類の超伝導ギャップが存在することが分かっている [36]。エネルギーギャップの大きさ  $|\Delta_{\ell\mathbf{k}}|$  は、

$$\Delta_{1\mathbf{k}} = \Delta_{2\mathbf{k}} = \delta_1 (\sin k_x + i \sin k_y) \quad (3.10)$$

$$\Delta_{3\mathbf{k}} = \delta_3 \left( \sin \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} + i \cos \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2} \right) \cos \frac{k_z}{2} \quad (3.11)$$

である。ここでは2次元バンドのエネルギーギャップにラインノードが入っている。これは、あとで述べるスピン帯磁率の Case A と同じものである。

### 3.3 計算結果

第 3.2 節で計算したオーダーパラメータを使い、式 (3.4) をもとに、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の比熱の温度依存性を計算した。 $\alpha$ 、 $\beta$  面と  $\gamma$  面とで値（パラメータ）を分け、

$k$ について和をとる方法である。運動エネルギーは式 (2.1)、(2.2)、(2.3) を使った。パラメータ  $t_1$  などの具体的な値は表 1 のとおりである。比熱とオーダーパラメータの温度依存性の計算結果は図 3、4 に示す。パラメータ  $g_{11}$ 、 $g_{13}$  を図に示されている値 ( $g_{11} = 0.38$ 、 $g_{13} = 0.265$ ) に選ぶと、実験結果 [17] をよく再現する結果が得られた。また、表 1 のパラメータは以下の全ての計算で同じ値である。

次に  $g_{11}$  が 2 次元バンドに働く引力のパラメータとし、ラインノードが 1 次元バンドにある場合についても、比熱の計算を行った。このときのオーダーパラメータは以下の式の解として得られる。

$$\delta_1 = g_{13} \sum_{\mathbf{k}} \delta_3 \frac{\tanh\left(\frac{E_{3\mathbf{k}}}{2T}\right)}{2E_{3\mathbf{k}}} \sin^2 k_x \quad (3.12)$$

$$\delta_3 = g_{11} \sum_{\mathbf{k}} \delta_3 \frac{\tanh\left(\frac{E_{3\mathbf{k}}}{2T}\right)}{2E_{3\mathbf{k}}} \sin^2 k_x + g_{13} \sum_{\mathbf{k}} \delta_1 \frac{\tanh\left(\frac{E_{1\mathbf{k}}}{2T}\right)}{2E_{1\mathbf{k}}} \sin^2 \frac{k_x}{2} \cos^2 \frac{k_y}{2} \cos^2 \frac{k_z}{2} \quad (3.13)$$

$$\Delta_{1\mathbf{k}} = \Delta_{2\mathbf{k}} = \delta_1 \left( \sin \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} + i \cos \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2} \right) \cos \frac{k_z}{2} \quad (3.14)$$

$$\Delta_{3\mathbf{k}} = \delta_3 (\sin k_x + i \sin k_y) \quad (3.15)$$

これは先ほどと違い、次章で述べるスピン帯磁率の Case C にあたる。同様に比熱とオーダーパラメータの温度依存性の計算結果を図 (5)、(6) に示す。

2 つの結果を比べてみると、ラインノードが 1 次元バンドにある場合と、2 次元バンドにある場合とで比熱の温度依存性に大差はないことが分かる。よって、比熱の温度依存性だけからは、ラインノードの詳細は分からないであろう。しかし、次に述べる動的スピン帯磁率からは、分かるものと期待される。

## 4 帯磁率

第 2 章で述べたように、比熱や NMR の実験から Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> のフェルミ面のエネルギーギャップにラインノードが存在することは、分かっているが、その詳細については、それらの実験では明らかにすることはできない。これは、第 3.3 章

	$\varepsilon_{01}, \varepsilon_{03}$	$t_1$	$t_3$	$t'$
$\varepsilon_{1\mathbf{k}}, \varepsilon_{2\mathbf{k}}$	0.24	0.31	-	-
$\varepsilon_{3\mathbf{k}}$	0.48	-	0.44	0.14

表 1: 計算に使用したパラメータ

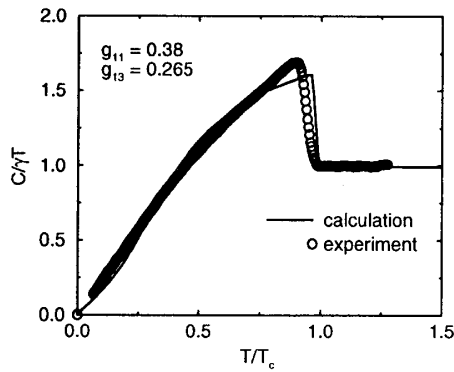


図 3: 2次元バンドにラインノードがある場合の比熱の温度依存性

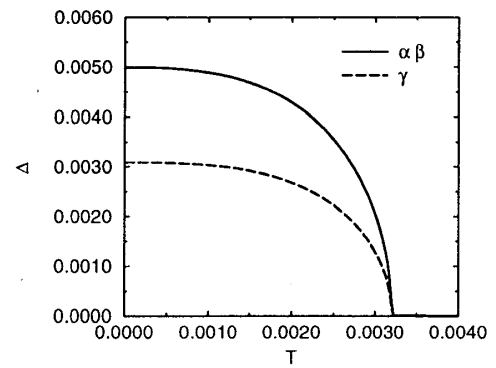


図 4: 2次元バンドにラインノードがある場合のオーダーパラメータの温度依存性

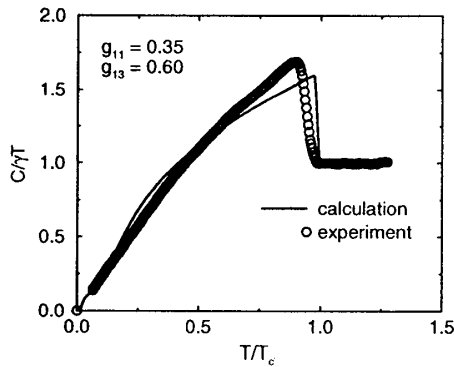


図 5: 1次元バンドにラインノードがある場合の比熱の温度依存性

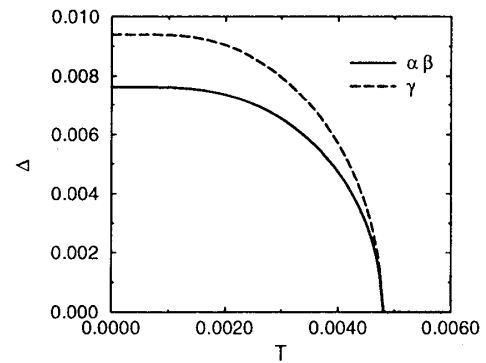


図 6: 1次元バンドにラインノードがある場合のオーダーパラメータの温度依存性

の計算結果からも明らかである。しかし、中性子散乱実験では、動的スピン帯磁率の虚部が得られ [37]、そこから超伝導のオーダーパラメータの詳細が分かるものと考えられている。この章では、オーダーパラメータの具体的な形をいくつかのケースについて考え、動的スピン帯磁率  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  を計算した。この結果を実験結果などと比較することにより、フェルミ面にラインノードがどのように入っているか、が分かるのではないかと考えられる。

## 4.1 形式化

動的スピン帯磁率の計算は、いくつかの理論によって研究され、具体的な式が得られている。スピントリプレットに拡張された、BCS 理論のペア相互作用

用以外の相互作用のない場合の帯磁率  $\chi_{ij}^0(\mathbf{q}, i\omega_m)$  は以下のとおりである。

$$\chi_{ij}^0(\mathbf{q}, i\omega_m) = -\frac{1}{4}T \sum_{n, \mathbf{k}} \text{Tr}(\hat{\alpha}_i \hat{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \hat{\alpha}_j \hat{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m)) \quad (4.1)$$

ここで、 $\omega_m = 2m\pi T$  と  $\varepsilon_n = (2n+1)\pi T$  は松原振動数 ( $m$  と  $n$  は整数) で、 $\hat{\alpha}$  と  $\hat{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$  はそれぞれ、スピンとグリーン関数の  $4 \times 4$  の南部表現である。具体的な形は以下に書く。まず  $\hat{\alpha}$  はパウリ行列  $\sigma^i (i = x, y, z)$  を使って、

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_i &= \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^y \sigma^i \sigma^y \end{pmatrix} \\ &= \frac{1 + \rho_z}{2} \sigma^i + \frac{1 - \rho_z}{2} \sigma^y \sigma^i \sigma^y \end{aligned} \quad (4.2)$$

と書ける。  $\rho_i (i = x, y, z)$  は、以下のように定義される。

$$\rho_x \sigma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

$$\rho_y \sigma^i = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^i \\ i\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

$$\rho_z \sigma^i = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & -\sigma^i \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

$\hat{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$  は、

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \begin{pmatrix} G(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) & F(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \\ F^\dagger(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) & -G(-\mathbf{k}, -i\varepsilon_n) \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

である。  $2 \times 2$  行列のグリーン関数  $G(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$  と異常グリーン関数  $F(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$  は、

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \tau) = -\langle T_\tau a_{\mathbf{k}\alpha}(\tau) a_{\mathbf{k}\beta}^\dagger(0) \rangle \quad (4.7)$$

$$F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \tau) = \langle T_\tau a_{\mathbf{k}\alpha}(\tau) a_{-\mathbf{k}\beta}(0) \rangle \quad (4.8)$$

のフーリエ成分である。

オーダーパラメータは、 $\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = i((\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma})\sigma^y)_{\alpha\beta}$  として、 $\mathbf{d}$  ベクトルで与えられる。つまり、

$$\begin{pmatrix} \Delta_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) & \Delta_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) & \Delta_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) & d_z(\mathbf{k}) \\ d_z(\mathbf{k}) & d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

と書くことができる。我々は、ユニタリー状態  $\mathbf{d}^*(\mathbf{k}) \times \mathbf{d}(\mathbf{k}) = 0$  のみを考える。このとき、

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = -\frac{\delta_{\alpha\beta}(i\varepsilon_n + \xi_{\mathbf{k}})}{\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2 + |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2} \quad (4.10)$$

$$F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k})}{\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2 + |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2} \quad (4.11)$$

である。式 (4.1) で、 $n$  の和を実行し、 $\Gamma \rightarrow +0$  で、 $i\omega_m \rightarrow \omega + i\Gamma$  と解析接続をすると、

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^0(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j \\ &\times \sum_{\mathbf{k}} \left\{ C_{\alpha\alpha'\beta\beta'}^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) D^{(-)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) (f(E_{\mathbf{k}'}) - f(E_{\mathbf{k}})) \right. \\ &\left. + C_{\alpha\alpha'\beta\beta'}^{(-)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) D^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) (1 - f(E_{\mathbf{k}'}) - f(E_{\mathbf{k}})) \right\} \quad (4.12) \end{aligned}$$

となる。 $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$  である。第一項は、準粒子の散乱による寄与で、第二項は、ペアを壊すことによる寄与である。ここで、 $C_{\alpha\alpha'\beta\beta'}^{(\pm)}$  は、超音波吸収や核磁気緩和率などを記述する時に出てくる、コヒーレンス因子と同じような形をしている。 $D^{(\pm)}$  とともに、具体的な形を以下に示す。具体的な計算は、Appendix.A に記しておく。

$$C_{\alpha\alpha'\beta\beta'}^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{\delta_{\alpha\beta'}\delta_{\alpha'\beta}}{2} \pm \frac{\delta_{\alpha\beta'}\delta_{\alpha'\beta}\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}'} - \text{Re}(\Delta_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k})\Delta_{\alpha'\beta'}(\mathbf{k}'))}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'}} \quad (4.13)$$

$$D^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{E_{\mathbf{k}} \pm E_{\mathbf{k}'} + \omega + i\Gamma} + \frac{1}{E_{\mathbf{k}} \pm E_{\mathbf{k}'} - \omega - i\Gamma} \quad (4.14)$$

また、実験で示されているように  $\mathbf{d}$  ベクトルは  $z$  軸に平行にとる。そのように  $\mathbf{d}$  ベクトルを選ぶと、 $i \neq j$  のときは  $\chi_{ij}^0 = 0$  となり、

$$\begin{aligned} \chi_{ii}^0(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \tilde{C}_{ii}^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) D^{(-)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) (f(E_{\mathbf{k}'}) - f(E_{\mathbf{k}})) \right. \\ &\left. + \tilde{C}_{ii}^{(-)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) D^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) (1 - f(E_{\mathbf{k}'}) - f(E_{\mathbf{k}})) \right\} \quad (4.15) \end{aligned}$$

となる。ここで、 $\tilde{C}_{ii}$  のそれぞれの方向における具体的な形は、

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{xx}^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \tilde{C}_{yy}^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \tilde{C}_{+-}^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \\ &= \frac{1}{2} \pm \frac{\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}'} - \text{Re}(d_z^*(\mathbf{k})d_z(\mathbf{k}'))}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'}} \quad (4.16) \end{aligned}$$

$$\tilde{C}_{zz}^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \pm \frac{\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}'} + \text{Re}(d_z^*(\mathbf{k})d_z(\mathbf{k}'))}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}'}} \quad (4.17)$$

となる。

式 (4.15) の形は、コヒーレンス因子  $\tilde{C}_{ii}^{(\pm)}$  の形により、 $+-$  方向と、 $zz$  方向では形が違うことが分かる。また、 $\tilde{C}_{ii}^{(\pm)}$  の異方性は、 $\mathbf{d}$  の積の符号によることが分かる。つまり、動的スピン帯磁率  $\chi_{ii}^0(\mathbf{q}, \omega)$  は、 $\mathbf{d}$  ベクトルの符号により形を変えるので、逆に  $\chi_{ii}^0(\mathbf{q}, \omega)$  を計算することによって、 $\mathbf{d}$  ベクトルの符号、つまりラインノードの位置が分かる、と考えることができる。

また、RPAを取り入れた動的スピン帯磁率  $\chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega)$  は、相互作用を  $U$  とし、以下ようになる。

$$\chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_{ij}^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U\chi_{ij}^0(\mathbf{q}, \omega)} \quad (4.18)$$

この章では、いくつかのケースのオーダーパラメータについて、動的スピン帯磁率の虚部を計算して、そのコヒーレンスピークの出現の違いを比較した。

## 4.2 計算結果

エネルギー分散は、比熱の計算のときに使ったものと同じものを用いる。パラメータも同じにする。 $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$  で、フェルミ面がネストしているときには、 $\mathbf{q}$  がネスティングベクトル  $\mathbf{Q}$  に等しいとき、 $\text{Im}\chi_{ij}^0(\mathbf{q}, \omega)$  の値が大きくなるので、今回  $\mathbf{q}$  は、ネスティングベクトル  $\mathbf{Q}$  に限定する。ノーマル状態の帯磁率は、

$$\chi_{\text{normal}}^0(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}}) - f(\xi_{\mathbf{k}'})}{\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}} - \omega - i\Gamma} \quad (4.19)$$

である。 $f(\xi)$  はフェルミ分布関数である。また虚部は、

$$\text{Im}\chi_{\text{normal}}^0(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} (f(\xi_{\mathbf{k}}) - f(\xi_{\mathbf{k}'})) \cdot \pi\delta(\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}} - \omega) \quad (4.20)$$

と書ける。完全にネスティングしている場合、 $\xi_{\mathbf{k}'} = -\xi_{\mathbf{k}}$  なので、以下のようにになる。

$$\begin{aligned} \text{Im}\chi_{\text{normal}}^0(\mathbf{Q}, \omega) &= \int d\xi_{\mathbf{k}} N(\xi_{\mathbf{k}}) (f(\xi_{\mathbf{k}}) - f(-\xi_{\mathbf{k}})) \pi\delta(-2\xi_{\mathbf{k}} - \omega) \\ &= \int d\xi_{\mathbf{k}} N(\xi_{\mathbf{k}}) (-1 + 2f(\xi_{\mathbf{k}})) \pi\delta(2\xi_{\mathbf{k}} + \omega) \\ &= \frac{\pi}{2} N\left(-\frac{\omega}{2}\right) (-1 + 2f\left(-\frac{\omega}{2}\right)) \\ &= \frac{\pi}{2} N\left(-\frac{\omega}{2}\right) (-1 + 2(1 - f(\xi_{\mathbf{k}}))) \\ &= \frac{\pi}{2} N\left(-\frac{\omega}{2}\right) (1 - 2f\left(\frac{\omega}{2}\right)) \end{aligned} \quad (4.21)$$

ここで状態密度一定として、 $N(-\omega/2) \approx N(0)$  とすると、

$$\text{Im}\chi_{\text{normal}}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{\pi}{2} N(0) (1 - 2f\left(\frac{\omega}{2}\right)) \quad (4.22)$$

となる。

### 4.2.1 Case A

まず、Case A として、以下の形のオーダーパラメータを考える。

$$d_{1z}(\mathbf{k}) = \Delta_1 \sin ak_x \quad (4.23)$$

$$d_{2z}(\mathbf{k}) = i\Delta_1 \sin ak_y \quad (4.24)$$

$$d_{3z}(\mathbf{k}) = \Delta_3 \left( \sin \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} + i \cos \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_y}{2} \right) \cos \frac{ck_z}{2} \quad (4.25)$$

これは、1次元バンドにはラインノードがなく、2次元バンドにラインノードがある、とするオーダーパラメータである。 $\chi_{zz}$  の虚部は式 (4.15) を使って、

$$\begin{aligned} \text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \underbrace{\left( \frac{1}{2} + \frac{\xi\xi' + \text{Re}(d^*d')}{2EE'} \right)}_{(1)} (\delta(E - E' - \omega) - \delta(E - E' + \omega)) \right. \\ &\quad \times \pi(f(E) - f(E')) \\ &\quad + \underbrace{\left( \frac{1}{2} - \frac{\xi\xi' + \text{Re}(d^*d')}{2EE'} \right)}_{(1)'} (\delta(E + E' - \omega) - \delta(E + E' + \omega)) \\ &\quad \left. \times \pi(1 - f(E) - f(E')) \right] \quad (4.26) \end{aligned}$$

である。簡単のため、 $\mathbf{k}'$  の添え字があるものについては、添え字を省略し、右肩に'をつけた。ここで、(1) と (1)' の部分を先に計算することにする。normal な場合と同様に完全ネスティングを考えると、 $\xi' = -\xi$  で、 $\mathbf{d}$  は1次元のオーダーパラメータを考えて、

$$\begin{aligned} (1) \ ((1)') &= \frac{1}{2} \pm \frac{\xi\xi' + \text{Re}(d^*d')}{2EE'} \\ &= \frac{1}{2} \pm \frac{-\xi^2 - \Delta^2}{2E^2} \\ &= \frac{1}{2} \pm \frac{-(\xi^2 + \Delta^2)}{2E^2} \\ &= \frac{1}{2} \pm \left( -\frac{1}{2} \right) \quad (4.27) \end{aligned}$$

となる。よって、(1) は0になり、(1)' は1となる。また、有限温度でのフェルミ分布関数の計算は、

$$\begin{aligned} 1 - f(E) - f(E') &= 1 - 2f(E) \\ &= 1 - \frac{2}{e^{E/T} + 1} \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 &= \frac{e^{E/2T} - e^{-E/2T}}{e^{E/2T} + e^{-E/2T}} \\
 &= \tanh \frac{E}{2T}
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

となる。この結果を使い、式 (4.26) を書きなおすと、

$$\begin{aligned}
 \text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) &= \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tanh \frac{E}{2T} (\delta(2E - \omega) - \delta(2E + \omega)) \\
 &= \frac{\pi}{2} \int d\xi N(\xi) \left( \delta\left(2\sqrt{\xi^2 + \Delta^2} - \omega\right) - \delta\left(2\sqrt{\xi^2 + \Delta^2} + \omega\right) \right) \tanh \frac{E}{2T} \\
 &= \frac{\pi}{2} \int d\xi N(\xi) \tanh \frac{E}{2T} \\
 &\quad \times \frac{\delta\left(\xi - \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2}\right) + \delta\left(\xi + \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2}\right)}{\left| \frac{2\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \right|} \text{sgn}(\omega) \\
 &= \frac{\pi}{4} \int d\xi N(\xi) \tanh \frac{E}{2T} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{\xi} \\
 &\quad \times \left( \delta\left(\xi - \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2}\right) + \delta\left(\xi + \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2}\right) \right) \text{sgn}(\omega) \\
 &= \frac{\pi}{4} \tanh \frac{\omega}{4T} \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - (2\Delta)^2}} \\
 &\quad \times \left( N\left(\sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2}\right) + N\left(-\sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2}\right) \right) \text{sgn}(\omega)
 \end{aligned} \tag{4.29}$$

となる。 $\delta$ 関数の定義などを使って、この式変形を行った。ここで、状態密度一定とすると、 $N(x) = N(-x) \approx N(0)$  なので、整理して書くと、

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{\pi}{2} N(0) \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - (2\Delta)^2}} \tanh \frac{\omega}{4T} \text{sgn}(\omega) \tag{4.30}$$

となる。これは、 $\omega/2 \geq \Delta$  のときのみ成り立つ。それ以外では0である。

つぎに  $\chi_{+-}^0$  を考える。このときに  $\chi_{+-}^0$  の虚部は、

$$\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \underbrace{\left( \frac{1}{2} + \frac{\xi\xi' - \text{Re}(d^*d')}{2EE'} \right)}_{(2)} (\delta(E - E' - \omega) - \delta(E - E' + \omega)) \right]$$

$$\begin{aligned}
 & \times \pi(f(E) - f(E')) \\
 & + \underbrace{\left( \frac{1}{2} - \frac{\xi\xi' - \text{Re}(d^*d')}{2EE'} \right)}_{(2)'} (\delta(E + E' - \omega) - \delta(E + E' + \omega)) \\
 & \times \pi(1 - f(E) - f(E'))] \tag{4.31}
 \end{aligned}$$

$\chi_{zz}$  と同様に、先に (2) と (2)' の部分を計算すると、(2) は  $d^2/E^2$  になり、(2)' は  $\xi^2/E^2$  になることが分かる。しかし、(2) のほうの項は、完全ネスティングを考えて  $E' = E$  とすると、0 になる。よって考えるべき項は、(2)' のほうの項のみである。もう一度書きなおすと、

$$\begin{aligned}
 \text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) &= \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\xi^2}{E^2} \tanh \frac{E}{2T} (\delta(2E - \omega) - \delta(2E + \omega)) \\
 &= \frac{\pi}{2} \int d\xi N(\xi) \frac{\xi^2}{E^2} \tanh \frac{E}{2T} (\delta(2E - \omega) - \delta(2E + \omega)) \\
 &= \frac{\pi}{2} \int d\xi N(\xi) \frac{\xi^2}{E^2} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2\xi} \tanh \frac{E}{2T} \\
 &\times \left( \delta \left( \xi - \sqrt{\left( \frac{\omega}{2} \right)^2 - \Delta^2} \right) + \delta \left( \xi + \sqrt{\left( \frac{\omega}{2} \right)^2 - \Delta^2} \right) \right) \text{sgn}(\omega) \\
 &= \frac{\pi}{2} \int d\xi N(\xi) \frac{\xi}{2E} \tanh \frac{E}{2T} \\
 &\times \left( \delta \left( \xi - \sqrt{\left( \frac{\omega}{2} \right)^2 - \Delta^2} \right) + \delta \left( \xi + \sqrt{\left( \frac{\omega}{2} \right)^2 - \Delta^2} \right) \right) \text{sgn}(\omega) \\
 &= \frac{\pi}{2} \frac{\sqrt{\omega^2 - (2\Delta)^2}}{2\omega} \tanh \frac{\omega}{4T} \\
 &\times \left( N \left( \sqrt{\left( \frac{\omega}{2} \right)^2 - \Delta^2} \right) + N \left( -\sqrt{\left( \frac{\omega}{2} \right)^2 - \Delta^2} \right) \right) \text{sgn}(\omega) \tag{4.32}
 \end{aligned}$$

$\chi_{zz}$  と同様に、状態密度一定として

$$\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{\pi}{2} \frac{\sqrt{\omega^2 - (2\Delta)^2}}{\omega} \tanh \frac{\omega}{4T} N(0) \text{sgn}(\omega) \tag{4.33}$$

となる。これも成り立つのは、 $\omega/2 \geq \Delta$  のときだけである。これらをまとめて書くと、以下のようになる。

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \begin{cases} 0 & |\omega| < 2\Delta \\ \frac{\pi}{2} N(0) \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - (2\Delta)^2}} \tanh \frac{\omega}{4T} & |\omega| \geq 2\Delta \end{cases} \tag{4.34}$$

$$\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \begin{cases} 0 & |\omega| < 2\Delta \\ \frac{\pi}{2} N(0) \frac{\sqrt{\omega^2 - (2\Delta)^2}}{\omega} \tanh \frac{\omega}{4T} & |\omega| \geq 2\Delta \end{cases} \tag{4.35}$$

以上の結果をまとめたものを図7に示す。また式 (4.18) により  $T = 0.0001(\text{eV})$ 、 $U = 0.175(\text{eV})$  として、RPA 近似したものを図8に示す。

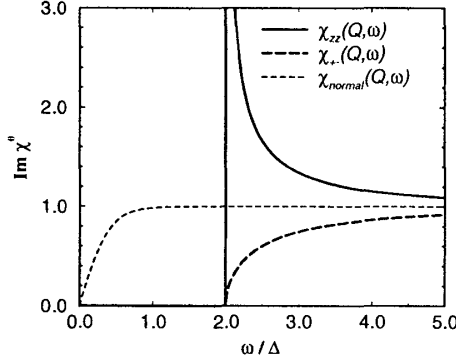


図 7: Case A の帯磁率：1 次元バンドにラインノードがある場合

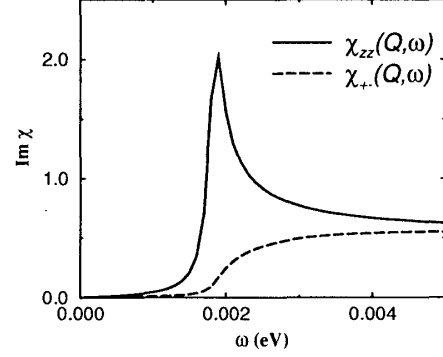


図 8: Case A の帯磁率： $U = 0.175(\text{eV})$

#### 4.2.2 Case B

Case B のオーダーパラメータは以下のように置いた。

$$d_{1z}(\mathbf{k}) = \Delta_1 \sin ak_x \cos ck_z \quad (4.36)$$

$$d_{2z}(\mathbf{k}) = i\Delta_1 \sin ak_y \cos ck_z \quad (4.37)$$

これは、Case A と異なり、1 次元バンドにラインノードがあるとするオーダーパラメータである。 $\chi(\mathbf{Q}, \omega)$  について、Case A のときと同様に計算を進める。また 1 次元バンドにラインノードがあるので、Case A と違い、ネスティングベクトル  $\mathbf{Q}_z$  依存性が出てくるので注意する。

(i)  $Q_z = 0$  のとき このときには  $d(\mathbf{k}') = -d(\mathbf{k})$  となり、 $\xi' = -\xi$ 、 $E' = E$  なので、有限温度での  $\chi_{zz}^0$  の虚部は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) &= \frac{\pi}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tanh \frac{E}{2T} (\delta(2E - \omega) - \delta(2E + \omega)) \\ &= \frac{\pi}{2} \int d\xi N(\xi) \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_z}{2\pi} \tanh \frac{E}{2T} (\delta(2E - \omega) - \delta(2E + \omega)) \end{aligned}$$

ここで、 $k_z$  の積分は  $\omega$  と  $\Delta$  の関係によって変わってくるので、注意する。まず、 $\frac{2\Delta}{|\omega|} \leq 1$  のときは、

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega)$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\pi}{2} \int d\xi N(\xi) \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_z}{2\pi} \tanh \frac{E}{2T} \\
 &\quad \delta \left( \xi - \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2 \cos^2 k_z} \right) + \delta \left( \xi + \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2 \cos^2 k_z} \right) \\
 &\times \frac{\left| \frac{2\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2 \cos^2 k_z}} \right|}{\text{sgn}(\omega)} \\
 &= \frac{\pi}{4} \tanh \frac{\omega}{4T} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_z}{2\pi} \frac{|\omega|}{\sqrt{\omega^2 - (2\Delta)^2 \cos^2 k_z}} \\
 &\times \left( N \left( \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2 \cos^2 k_z} \right) + N \left( -\sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2 \cos^2 k_z} \right) \right) \\
 &= \frac{1}{8} N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \frac{|\omega|}{\sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2 \cos^2 k_z}} \\
 &= \frac{1}{4} N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 \cos^2 k_z}} \\
 &= N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk_z \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 \cos^2 k_z}} \tag{4.38}
 \end{aligned}$$

ここで、 $k_z = \pi - \theta$  として変数変換を実行し、第一種完全楕円積分  $K(m)$

$$K(m) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - m \sin^2 \theta}} \tag{4.39}$$

を使って書きなおすことができ、

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0) K \left( \left( \frac{2\Delta}{\omega} \right)^2 \right) \tanh \frac{\omega}{4T} \tag{4.40}$$

となる。

次に、 $2\Delta/\omega \geq 1$  のときを考える。このとき式 (4.38) の  $k_z$  積分は、平方根の中が正の部分のみ実行しなければならない。式 (4.38) は

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk_z \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 \cos^2 k_z}} \tag{4.41}$$

である。ここで、 $\cos k_z = x$  とおいて、変数変換を行う。

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 x^2}} \tag{4.42}$$

この式で、 $2\Delta/\omega \geq 1$ なので、積分は  $\sqrt{\quad}$  の中が正になる部分の範囲のみに  
いて、行わなければならない。よって積分範囲が変わり、

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_0^{\frac{\omega}{2\Delta}} \frac{dx}{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1-\left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 x^2}} \quad (4.43)$$

となる。これは、第一種不完全楕円積分  $F(\phi|m)$

$$F(\phi|m) = \int_0^{\sin \phi} \frac{dt}{\sqrt{1-t^2} \sqrt{1-mt^2}} \quad (4.44)$$

と見比べて、結果的に

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0) F\left(\arcsin\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) \middle| \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} \quad (4.45)$$

となる。

次に  $\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega)$  について考える。

$$\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2} \sum_k \frac{\xi^2}{E^2} (\delta(2E - \omega) - \delta(2E + \omega)) \tanh \frac{E}{2T} \quad (4.46)$$

これも、 $k_z$  の満たす範囲に限られるので、 $\omega$  と  $\Delta$  との関係に注意しなければ  
いけない。まず、 $\frac{2\Delta}{|\omega|} < 1$  のときには、

$$\begin{aligned} & \text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) \\ &= \frac{1}{8} \int d\xi N(\xi) \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \frac{\xi}{E} \tanh \frac{E}{2T} \\ & \times \left( \delta\left(\xi - \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2 \cos^2 k_z}\right) \right. \\ & + \left. \delta\left(\xi + \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 - \Delta^2 \cos^2 k_z}\right) \right) \text{sgn}(\omega) \\ &\approx \frac{1}{4} N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 \cos^2 k_z} \\ &= N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk_z \sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 \cos^2 k_z} \quad (4.47) \end{aligned}$$

となる。ここで、 $k_z = \pi - \theta$  とおいて、変数変換を行うと、

$$\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 \sin^2 \theta} \quad (4.48)$$

となる。ここで、第二種完全楕円積分  $E(m)$

$$E(m) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sqrt{1 - m \sin^2 \theta} \quad (4.49)$$

を使って書きなおすことができ、

$$\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0)E\left(\left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} \quad (4.50)$$

となる。次に  $\frac{2\Delta}{|\omega|} \geq 1$  のときを考える。式 (4.48) から、

$$\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk_z \sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 \cos^2 k_z} \quad (4.51)$$

である。ここで、 $\cos k_z = x$  とおいて、変数変換をすると、

$$\begin{aligned} \text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) &= N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_0^1 dx \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 x^2}}{\sqrt{1 - x^2}} \\ &= N(0) \tanh \frac{\omega}{4T} \int_0^{\frac{\omega}{2\Delta}} dx \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2 x^2}}{\sqrt{1 - x^2}} \end{aligned} \quad (4.52)$$

となる。2式目は、 $\sqrt{\quad}$  の中身が負にならないように、積分範囲を制限している。これは、第二種不完全楕円積分  $E(\phi|m)$

$$E(\phi|m) = \int_0^{\sin \phi} \frac{\sqrt{1 - mt^2}}{\sqrt{1 - t^2}} dt \quad (4.53)$$

と見比べて、結果的に、

$$\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0)E\left(\arcsin\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) \middle| \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} \quad (4.54)$$

となる。以上の結果を下にまとめた。

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \begin{cases} N(0)F\left(\arcsin\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) \middle| \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} & |\omega| < 2\Delta \\ N(0)K\left(\left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} & |\omega| \geq 2\Delta \end{cases} \quad (4.55)$$

$$\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \begin{cases} N(0)E\left(\arcsin\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) \middle| \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} & \omega < 2\Delta \\ N(0)E\left(\left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} & \omega \geq 2\Delta \end{cases} \quad (4.56)$$

(ii)  $Q_z = \pi/2$  のとき この場合は  $T = 0$  で計算する。このときは、 $\xi' = -\xi$  だが、 $d' \neq d$  で、 $d' = \Delta \cos(k_z + \frac{\pi}{2}) = -\Delta \sin k_z$  となる。よって、 $E \neq E'$  であり、以下のようにになる。

$$E = \sqrt{\xi^2 + \Delta \cos^2 k_z} \quad (4.57)$$

$$E' = \sqrt{\xi^2 + \Delta \sin^2 k_z} \quad (4.58)$$

また、このため  $\text{Im}\chi_{zz} = \text{Im}\chi_{+-}$  となる。この点を考慮して、 $\text{Im}\chi_{zz(+)}^0(\mathbf{Q}, \omega)$  を考える。簡単のために、状態密度は一定として積分の外に出しておく。

$$\begin{aligned} \text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) &= \text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) \\ &= \frac{N(0)}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_z}{2\pi} \int \left( \frac{1}{2} - \frac{-\xi^2 + \text{Re}(d_z^* d'_z)}{2EE'} \right) \\ &\quad \times \pi(\delta(E + E' + \omega) + \delta(E + E' - \omega)) d\xi \\ &= \frac{N(0)}{4} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \int \left( \frac{1}{2} + \frac{\xi^2 - \Delta^2 \cos k_z \sin k_z}{2EE'} \right) \\ &\quad \times \frac{\delta(\xi - \xi_0) + \delta(\xi + \xi_0)}{|\frac{\xi}{E} + \frac{\xi}{E'}|} d\xi \\ &= \frac{N(0)}{4} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \left( \frac{EE' + \xi_0^2 - \Delta^2 \cos k_z \sin k_z}{2} \right) \frac{2}{|\xi_0|(E + E')} \\ &= \frac{N(0)}{4} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \frac{EE' + \xi_0^2 - \Delta^2 \cos k_z \sin k_z}{|\xi_0|(E + E')} \end{aligned}$$

ここで、 $\xi_0$  は  $E + E' \pm \omega = 0$  の  $\xi$  についての解であり、以下のようにになる。

$$\xi_0 = \sqrt{\frac{\omega^4 + \Delta^4 \cos^2 k_z - 2\Delta^2 \omega^2}{(2\omega)^2}} \quad (4.59)$$

また、 $k_z$  の積分を行う際に、 $\cos k_z \sin k_z$  の項は、0 になるので、先に落としておく。また  $E + E' = \omega$  である。以上のことを考慮して、 $\chi(\mathbf{Q}, \omega)$  の計算を続ける。

$$\begin{aligned} \text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) &= N(0) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{|\xi_0|^2 + \sqrt{\xi_0^2 + \Delta^2 \cos^2 k_z} \sqrt{\xi_0^2 + \Delta^2 \sin^2 k_z}}{|\xi_0|\omega} \\ &= N(0) \frac{4}{(2\omega)^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk_z \frac{\omega^4 - \Delta^2 \omega^2}{\sqrt{\omega^4 + \Delta^4 \cos^2 2k_z - 2\Delta^2 \omega^2}} \\ &= N(0) \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk_z \frac{\omega^2 - \Delta^2}{\sqrt{(\omega^2 - \Delta^2)^2 - \Delta^4 \sin^2 2k_z}} \\ &= N(0) \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk_z \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\Delta^4}{(\omega^2 - \Delta^2)^2} \sin^2 2k_z}} \quad (4.60) \end{aligned}$$

ここで、 $\omega < \Delta$  のときには  $k_z$  の積分範囲はなく、値は 0 である。一方、 $\omega \geq \sqrt{2}\Delta$  のときには、第一種完全楕円積分  $K(m)$  が使えて、

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = K\left(\frac{\Delta^4}{(\omega^2 - \Delta^2)^2}\right) \quad (4.61)$$

となる。また、それ以外のとき ( $\Delta \leq \omega < \sqrt{2}\Delta$ ) には、 $\sin 2\theta = t$  とおいて変数変換を実行する。

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0) \int_0^\phi dt \frac{1}{\sqrt{1-t^2}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\Delta^4}{(\omega^2 - \Delta^2)^2} t^2}} \quad (4.62)$$

ここで、積分の上限  $\phi$  は  $\phi = \frac{\omega^2 - \Delta^2}{\Delta^2}$  である。この形は第一種不完全楕円積分  $F(\phi|m)$  を使うことができるので、

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = N(0) F\left(\arcsin\left(\frac{\omega^2 - \Delta^2}{\Delta^2}\right) \middle| \frac{\Delta^4}{(\omega^2 - \Delta^2)^2}\right) \quad (4.63)$$

と書ける。よって、以上の結果をまとめると、

$$\begin{aligned} \text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) &= \text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) \\ &= \begin{cases} 0 & \omega < \Delta \\ N(0) F\left(\arcsin\left(\left(\frac{\omega}{\Delta}\right)^2 - 1\right) \middle| \frac{1}{((\omega/\Delta)^2 - 1)^2}\right) & \Delta \leq \omega < \sqrt{2}\Delta \\ K\left(\frac{1}{((\omega/\Delta)^2 - 1)^2}\right) & \omega \geq \sqrt{2}\Delta \end{cases} \quad (4.64) \end{aligned}$$

となる。

(iii)  $Q_z = \pi$  のとき このときには、 $d(\mathbf{k}') = d(\mathbf{k})$  となり、ちょうど  $Q_z = 0$  のときの  $\chi_{+-}^0$  と  $\chi_{zz}^0$  が逆転する形となる。よって、

$$\text{Im}\chi_{zz}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \begin{cases} N(0) E\left(\arcsin\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) \middle| \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} & |\omega| < 2\Delta \\ N(0) E\left(\left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} & |\omega| \geq 2\Delta \end{cases} \quad (4.65)$$

$$\text{Im}\chi_{+-}^0(\mathbf{Q}, \omega) = \begin{cases} N(0) F\left(\arcsin\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) \middle| \left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} & |\omega| < 2\Delta \\ N(0) K\left(\left(\frac{2\Delta}{\omega}\right)^2\right) \tanh \frac{\omega}{4T} & |\omega| \geq 2\Delta \end{cases} \quad (4.66)$$

となる。

以上の結果をまとめたものが、図 9 にある。

また Case A と同じパラメータを用い、RPA 近似したものを図 10 に示す。



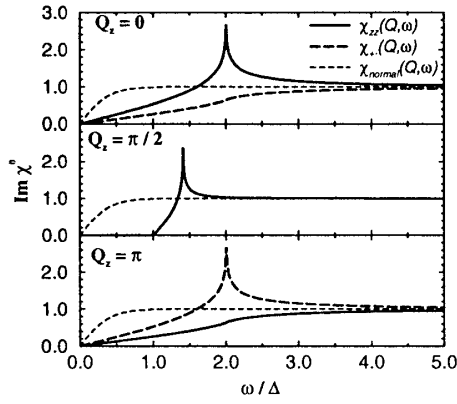
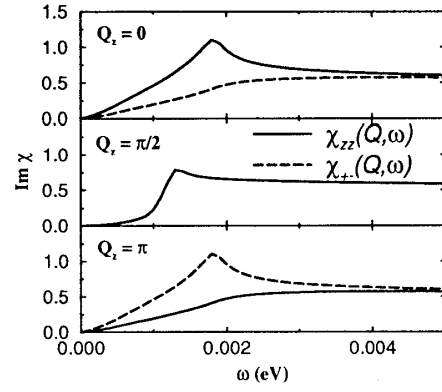


図 9: 1次元バンドにラインノードがある場合


 図 10: Case B の帯磁率:  $U = 0.175(\text{eV})$ 

#### 4.2.3 Case C

Case Cとして、オーダーパラメータを以下のように置いた。

$$\begin{aligned} d_{1z}(\mathbf{k}) &= d_{2z}(\mathbf{k}) \\ &= \Delta_1 \left( \sin \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} + i \cos \frac{ak_x}{2} \sin \frac{ak_y}{2} \right) \cos \frac{ck_z}{2} \end{aligned} \quad (4.67)$$

これは、Case Bと同じように1次元バンドにラインノードが入っているが、 $\cos \frac{k_z}{2}$ の依存性で入っている。このときの $\chi(\mathbf{Q}, \omega)$ の虚部は、前述の2つのケースと違って、簡単な楕円積分等で表すことができないので、 $\mathbf{k}$ の和をとり、数値的に計算した。 $\Delta_1 = 0.001(\text{eV})$ 、 $T = 0.0001(\text{eV})$ 、 $\Gamma = 0.0001(\text{eV})$ としている。結果を図11に示し、RPA近似したものを図12に示す。

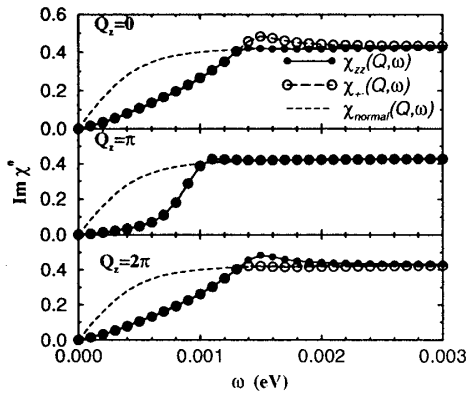
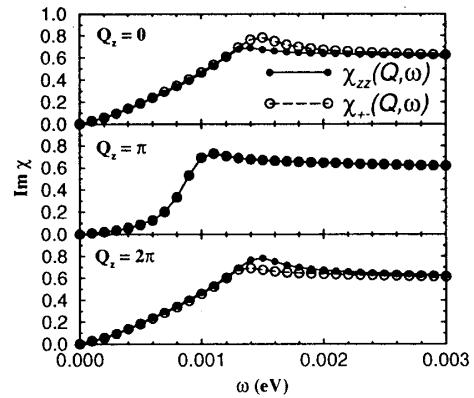


図 11: Case C の帯磁率: 1次元バンドにラインノードがある場合


 図 12: Case C の帯磁率:  $U = 0.175(\text{eV})$

## 5 考察

$\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  は、スピントリプレット超伝導という従来の超伝導とは違った性質を持つものとして、注目されている。しかし、そのオーダーパラメータや発現機構の詳細については、いくつかの議論があり、確定的なものは得られていない。

今回は、いくつかのオーダーパラメータについての  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の比熱  $C$  の温度依存性と、動的スピン帯磁率  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  の  $\omega$  依存性について計算した。これらの計算は、オーダーパラメータの詳細を知る手がかりになる、と考えられる。

比熱については2つのオーダーパラメータを想定して、温度依存性を計算した。結果、オーダーパラメータによってその温度依存性が大きく変化する、ということとはなかった。つまり、比熱の温度依存性のみからはオーダーパラメータの詳細は分からないと言える。

一方、動的スピン帯磁率では、3つのケースのオーダーパラメータについて  $\omega$  依存性を計算した。その結果、オーダーパラメータの違いにより帯磁率に変化が現れた。この動的スピン帯磁率は、非弾性中性子散乱の実験などから得られることが分かっている。しかし、現段階での非弾性中性子散乱の実験では、超伝導状態になったときの電子状態の変化を測定するまでの解像度は得られていない [38, 39]。今後、超伝導状態における非弾性中性子散乱の実験結果が得られれば、今回の理論の結果と比較することにより、オーダーパラメータが決定できるであろう、と期待される。

## 6 謝辞

本論文の作成にあたり、高橋慶紀教授、長谷川泰正助教授、中野博生助手には、いろいろご指導いただき、本当にありがとうございました。特に直接ご指導いただいた長谷川助教授には深く感謝いたします。また、高橋、長谷川両先生には、学部時代を含め、数年間にわたり大変お世話になりました。感謝の気持ちでいっぱいです。

京都大学の前野さん、出口さんには  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の比熱のデータを提供していただきました。ありがとうございました。

また、熊本大学教育学部の岸木敬太さん、産業技術総合研究所の宮崎真長さん、応用数学講座OBの岡崎暢寿さん、中川友宏さん、中須敦志さん、津田尚孝さん、同期の舩谷隆彰さんの各皆さんには、研究の面だけでなく、様々な形でお世話になりました。ありがとうございました。そのほか応用数学講座の皆さんには大変お世話になりました。

最後になりましたが、精神面で支えていただいた学内、学外の友人たち、家族に、感謝します。ありがとうございました。

## A Appendix. A

b ここでは、式 (4.12) 式 (4.13)、(4.14) の導出を示す。まず、式 (4.12) を行列表示で書く。

$$\begin{aligned}
 \chi_{ij}^0(\mathbf{q}, i\omega_m) &= -\frac{T}{4} \sum_{n, \mathbf{k}} \text{Tr} \left( \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^y \sigma^i \sigma^y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) & F(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \\ F^\dagger(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) & -G(-\mathbf{k}, -i\varepsilon_n) \end{pmatrix} \right) \\
 &\times \begin{pmatrix} \sigma^j & 0 \\ 0 & \sigma^y \sigma^j \sigma^y \end{pmatrix} \\
 &\times \begin{pmatrix} G(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m) & F(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m) \\ F^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m) & -G(-\mathbf{k} - \mathbf{q}, -i\varepsilon_n - i\omega_m) \end{pmatrix} \\
 &= -\frac{T}{4} \sum_{n, \mathbf{k}} \text{Tr} \left( \begin{pmatrix} \sigma^i G & \sigma^i F \\ \sigma^y \sigma^i \sigma^y F^\dagger & -\sigma^y \sigma^i \sigma^y \bar{G} \end{pmatrix} \right) \\
 &\times \begin{pmatrix} \sigma^j G' & \sigma^j F' \\ \sigma^y \sigma^j \sigma^y F'^\dagger & -\sigma^y \sigma^j \sigma^y \bar{G}' \end{pmatrix} \\
 &= -\frac{T}{4} \sum_{n, \mathbf{k}} \text{Tr}_2 (\sigma^i G \sigma^j G' + \sigma^i F \sigma^y \sigma^j \sigma^y F'^\dagger \\
 &+ \sigma^y \sigma^i \sigma^y F^\dagger \sigma^j F' + \sigma^y \sigma^i \sigma^y \bar{G} \sigma^y \sigma^j \sigma^y \bar{G}') \\
 &= -\frac{T}{4} \sum_{n, \mathbf{k}} \text{Tr}_2 (\sigma^i G \sigma^j G' - \sigma^i F^\tau \sigma^j F'^\dagger - {}^\tau \sigma^i F^\dagger \sigma^j F' + {}^\tau \sigma^i \bar{G}^\tau \sigma^j \bar{G}') \\
 &= -\frac{T}{4} \sum_{n, \mathbf{k}} \sum_{\alpha\alpha' \beta\beta'} (\sigma_{\alpha\alpha'}^i G_{\alpha'\beta} \sigma_{\beta\beta'}^j G'_{\beta'\alpha} - \sigma_{\alpha\alpha'}^i F_{\alpha'\beta} \sigma_{\beta'\beta}^j F'_{\alpha\beta'} \\
 &- \sigma_{\alpha'\alpha}^i F_{\beta\alpha'}^* \sigma_{\beta\beta'}^j F'_{\beta'\alpha} + \sigma_{\alpha'\alpha}^i \bar{G}_{\alpha'\beta} \sigma_{\beta'\beta}^j \bar{G}'_{\beta'\alpha}) \\
 &= -\frac{T}{4} \sum_{n, \mathbf{k}} \sum_{\alpha\alpha' \beta\beta'} \sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j \\
 &\times (G_{\alpha'\beta} G'_{\beta'\alpha} - F_{\alpha'\beta'} F_{\alpha\beta}^* - F_{\beta\alpha}^* F'_{\beta'\alpha'} + \bar{G}_{\alpha\beta'} \bar{G}'_{\beta\alpha'})
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

簡単のため、2 式目以降は引数の表記を省いている。ここで、

$$G'(\text{or } F') = G(\text{or } F)(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m) \tag{A.2}$$

$$\bar{G} = G(-\mathbf{k}, -i\varepsilon_n) \tag{A.3}$$

である。また  $\text{Tr}_2$  は 2 行 2 列のトレースを表す記号として用いている。なお、4 式目から 5 式目への変形は、4 式目の 2 項目で  $\beta \leftrightarrow \beta'$ 、3 項目で  $\alpha \leftrightarrow \alpha'$ 、4 項目で  $\alpha \leftrightarrow \alpha', \beta \leftrightarrow \beta'$  としている。また  $G$  の定義より

$$G_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$$

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = G_{\beta\alpha}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$$

を使うと、4項目は

$$\begin{aligned}
 & \sum_{n,\mathbf{k}} G_{\beta'\alpha}(-\mathbf{k}, -i\varepsilon_n) G_{\alpha'\beta}(-\mathbf{k} - \mathbf{q}, -i\varepsilon_n - i\omega_m) \\
 &= \sum_{n',\mathbf{k}'} G_{\alpha'\beta}(\mathbf{k}', i\varepsilon_{n'}) G_{\beta'\alpha}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, i\varepsilon_{n'} + i\omega_m)
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

となって、1項目の  $G$  の積と同じになる。また、ここでは  $-\mathbf{k} - \mathbf{q} = \mathbf{k}'$ 、 $-(\varepsilon_n + \omega_m) = \varepsilon_{n'}$  とおいている。次に  $F$  は、

$$\begin{aligned}
 F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) &= -F_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \\
 &= F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, -i\varepsilon_n) \\
 &= F_{\beta\alpha}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)
 \end{aligned}$$

であるので、2項目を考えると、

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{n,\mathbf{k}} F_{\alpha'\beta'}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) F_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m) \\
 &= - \sum_{n',\mathbf{k}'} F_{\alpha'\beta'}(-\mathbf{k}' - \mathbf{q}, -i\varepsilon_{n'} - i\omega_m) F_{\alpha\beta}^*(-\mathbf{k}', -i\varepsilon_{n'}) \\
 &= - \sum_{n,\mathbf{k}} F_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) F_{\alpha'\beta'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m)
 \end{aligned} \tag{A.5}$$

となる。最後の式変形は  $G$  のときと同じように、 $-\mathbf{k} - \mathbf{q} = \mathbf{k}'$ 、 $-(\varepsilon_n + \omega_m) = \varepsilon_{n'}$  とおいている。また、3項目は

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{n,\mathbf{k}} F_{\beta\alpha}^*(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) F_{\beta'\alpha'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m) \\
 &= - \sum_{n,\mathbf{k}} F_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) F_{\alpha'\beta'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m)
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

となり、2項目と同じになる。

以上をまとめると、

$$\begin{aligned}
 \chi_{ij}^0(\mathbf{q}, i\omega_m) &= - \frac{T}{2} \sum_{n,\mathbf{k}} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j \{ G_{\alpha'\beta}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) G_{\beta'\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m) \\
 &\quad - F_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) F_{\alpha'\beta'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m) \}
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

となる。

ここから、それぞれの項について、計算をしていく。まずはじめに、 $G$  の積の項について考える。

$$- \frac{T}{2} \sum_{n,\mathbf{k}} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j G_{\alpha'\beta}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) G_{\beta'\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\varepsilon_n + i\omega_m)$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{T}{2} \sum_{n, \mathbf{k}} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j \frac{(i\varepsilon_n + \xi_{\mathbf{k}})(i\varepsilon_{n+m} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{(\varepsilon_n^2 + E_{\mathbf{k}}^2)(\varepsilon_{n+m}^2 + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^2)} \delta_{\alpha'\beta} \delta_{\beta'\alpha} \\
 &= -\frac{T}{2} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\mathbf{k}} \sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j \\
 &\quad \times \frac{-\varepsilon_n \varepsilon_{n+m} + \xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{n+m} \xi_{\mathbf{k}})}{(\varepsilon_n^2 + E_{\mathbf{k}}^2)(\varepsilon_{n+m}^2 + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^2)} \delta_{\alpha'\beta} \delta_{\beta'\alpha} \\
 &= \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \delta_{\alpha'\beta} \delta_{\beta'\alpha} \frac{\sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j}{2} \frac{1}{2\pi i} \\
 &\quad \times \sum_{\mathbf{k}} \oint_c f(z) \frac{z(z + i\omega_m) + \xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{(-z^2 + E_{\mathbf{k}}^2)(-(z + i\omega_m)^2 + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^2)} dz \quad (\text{A.8})
 \end{aligned}$$

ここで、3式目から4式目では、分子の  $i$  がかった部分は  $n$  の和で消えるので、落としてある。この経路積分において、特異点は  $z = E_{\mathbf{k}}, -E_{\mathbf{k}}, E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - i\omega_m, -E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - i\omega_m$  の4つである。簡単のため、 $\xi_{\mathbf{k}} \rightarrow \xi$ 、 $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rightarrow \xi'$ 、 $E_{\mathbf{k}} \rightarrow E$ 、 $E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rightarrow E'$  とおいて、留数定理を使うと、

$$\begin{aligned}
 (\chi^0 \text{の第一項}) &= \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \delta_{\alpha'\beta} \delta_{\beta'\alpha} \frac{\sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j}{2} (-1) \sum_{\mathbf{k}} \left[ f(E) \frac{E(E + i\omega_m) + \xi\xi'}{2E((E + i\omega_m)^2 - E'^2)} \right. \\
 &\quad + f(-E) \frac{-E(-E + i\omega_m) + \xi\xi'}{-2E((E - i\omega_m)^2 - E'^2)} \\
 &\quad + f(E' - i\omega_m) \frac{(E' - i\omega_m)E' + \xi\xi'}{((E' - i\omega_m)^2 - E^2)2E'} \\
 &\quad \left. + f(-E' - i\omega_m) \frac{(E' + i\omega_m)E' + \xi\xi'}{((E' + i\omega_m)^2 - E^2)(-2E')} \right] \quad (\text{A.9})
 \end{aligned}$$

となる。ここで、

$$f(E' - i\omega_m) = f(E')$$

$$f(-E) = 1 - f(E)$$

なので、上式は

$$\begin{aligned}
 (\chi^0 \text{の第一項}) &= \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \delta_{\alpha'\beta} \delta_{\beta'\alpha} \frac{\sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j}{2} (-1) \\
 &\quad \times \sum_{\mathbf{k}} \left[ f(E) \frac{E(E + i\omega_m) + \xi\xi'}{2E(E - E' + i\omega_m)(E + E' + i\omega_m)} \right. \\
 &\quad + (1 - f(E)) \frac{E(E - i\omega_m) + \xi\xi'}{-2E(E - E' - i\omega_m)(E + E' - i\omega_m)} \\
 &\quad \left. + f(E') \frac{(E' - i\omega_m)E' + \xi\xi'}{2(E' - E - i\omega_m)(E' + E - i\omega_m)E'} \right]
 \end{aligned}$$

$$+ (1 - f(E')) \frac{(E' + i\omega_m)E' + \xi\xi'}{-2(E' - E + i\omega_m)(E' + E + i\omega_m)E'} \Big] \quad (\text{A.10})$$

となる。[ ]内の計算を進めていく。以下より簡単のため、 $f(E) \rightarrow f$ 、 $f(E') \rightarrow f'$ としている。

$$\begin{aligned} [ ] = & f \left\{ \left( \frac{1}{E + E' + i\omega_m} + \frac{1}{E - E' + i\omega_m} \right) \frac{E(E + i\omega_m)}{2E \cdot 2(E + i\omega_m)} \right. \\ & + \left. \left( \frac{1}{E + E' + i\omega_m} - \frac{1}{E - E' + i\omega_m} \right) \frac{-\xi\xi'}{2E \cdot 2E'} \right\} \\ & + (1 - f) \left\{ \left( \frac{1}{E + E' - i\omega_m} + \frac{1}{E - E' - i\omega_m} \right) \frac{E(E - i\omega_m)}{-2E \cdot 2(E - i\omega_m)} \right. \\ & + \left. \left( \frac{1}{E + E' - i\omega_m} - \frac{1}{E - E' - i\omega_m} \right) \frac{\xi\xi'}{(-2E)(-2E')} \right\} \\ & + f' \left\{ \left( \frac{1}{E + E' - i\omega_m} + \frac{1}{-(E - E' + i\omega_m)} \right) \frac{E'(E' - i\omega_m)}{2E' \cdot 2(E' - i\omega_m)} \right. \\ & + \left. \left( \frac{1}{E + E' - i\omega_m} - \frac{1}{-(E - E' + i\omega_m)} \right) \frac{\xi\xi'}{2E'(-2E)} \right\} + (1 - f') \\ & \times \left\{ \left( \frac{1}{E + E' + i\omega_m} + \frac{1}{-(E - E' - i\omega_m)} \right) \frac{E'(E' + i\omega_m)}{(-2E') \cdot 2(E' + i\omega_m)} \right. \\ & + \left. \left( \frac{1}{E + E' + i\omega_m} - \frac{1}{-(E - E' - i\omega_m)} \right) \frac{\xi\xi'}{(-2E')(-2E)} \right\} \quad (\text{A.11}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} = & \frac{1}{4} \left[ \frac{f}{E + E' + i\omega_m} + \frac{f}{E - E' + i\omega_m} + \frac{-(1 - f)}{E + E' - i\omega_m} + \frac{-(1 - f)}{E - E' - i\omega_m} \right. \\ & + \frac{f'}{E + E' - i\omega_m} + \frac{-f'}{E - E' + i\omega_m} + \frac{-(1 - f')}{E + E' + i\omega_m} + \frac{(1 - f')}{E - E' - i\omega_m} \Big] \\ & + \frac{\xi\xi'}{4EE'} \left[ \frac{-f}{E + E' + i\omega_m} + \frac{f}{E - E' + i\omega_m} \right. \\ & + \frac{1 - f}{E + E' - i\omega_m} + \frac{-(1 - f)}{E - E' - i\omega_m} \\ & + \frac{-f'}{E + E' - i\omega_m} + \frac{-f'}{E - E' + i\omega_m} \\ & + \left. \frac{1 - f'}{E + E' + i\omega_m} + \frac{1 - f'}{E - E' - i\omega_m} \right] \quad (\text{A.12}) \\ = & \frac{1}{4} \left[ \frac{f - f'}{E - E' + i\omega_m} + \frac{-1 + f + 1 - f'}{E - E' - i\omega_m} \right. \\ & + \left. \frac{f - (1 - f')}{E + E' + i\omega_m} + \frac{-(1 - f) + f'}{E + E' - i\omega_m} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\xi\xi'}{4EE'} \left[ \frac{f-f'}{E-E'+i\omega_m} + \frac{-(1-f)+(1-f')}{E-E'-i\omega_m} \right. \\
 & \left. + \frac{-f+(1-f')}{E+E'+i\omega_m} + \frac{1-f-f'}{E+E'-i\omega_m} \right] \quad (A.13)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 = & \frac{1}{4} \left[ \left( \frac{1}{E-E'+i\omega_m} + \frac{1}{E-E'-i\omega_m} \right) (f-f') \right. \\
 & + \left( \frac{1}{E+E'+i\omega_m} + \frac{1}{E+E'-i\omega_m} \right) (f+f'-1) \Big] \\
 & + \frac{\xi\xi'}{4EE'} \left[ \left( \frac{1}{E-E'+i\omega_m} + \frac{1}{E-E'-i\omega_m} \right) (f-f') \right. \\
 & + \left( \frac{1}{E+E'+i\omega_m} + \frac{1}{E+E'-i\omega_m} \right) (1-f-f') \Big] \quad (A.14)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 = & \left( \frac{1}{E-E'+i\omega_m} + \frac{1}{E-E'-i\omega_m} \right) \left( \frac{1}{4} + \frac{\xi\xi'}{4EE'} \right) (f-f') \\
 & + \left( \frac{1}{E+E'+i\omega_m} + \frac{1}{E+E'-i\omega_m} \right) \left( \frac{1}{4} - \frac{\xi\xi'}{4EE'} \right) (1-f-f') \quad (A.15)
 \end{aligned}$$

よって、 $\chi_{ij}^0(\mathbf{q}, i\omega_m)$  の第一項  $GG$  からくる寄与は、

$$\begin{aligned}
 (\chi^0 \text{ の第一項}) &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \delta_{\alpha'\beta} \delta_{\beta'\alpha} \sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j \\
 &\times \sum_{\mathbf{k}} \left[ \left( \frac{1}{2} + \frac{\xi\xi'}{2EE'} \right) \left( \frac{1}{E-E'+i\omega_m} + \frac{1}{E-E'-i\omega_m} \right) (f'-f) \right. \\
 &\quad \left. + \left( \frac{1}{2} - \frac{\xi\xi'}{2EE'} \right) \left( \frac{1}{E+E'+i\omega_m} + \frac{1}{E+E'-i\omega_m} \right) (1-f-f') \right] \quad (A.16)
 \end{aligned}$$

となる。

また、 $\chi_{ij}^0(\mathbf{q}, i\omega_m)$  の第2項の  $FF$  からの寄与は、

$$(\chi^0 \text{ の第2項}) = \frac{T}{2} \sum_{n,\mathbf{k}} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j \frac{\Delta_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k})}{\varepsilon_n^2 + E_{\mathbf{k}}^2} \frac{\Delta_{\alpha'\beta'}(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{(\varepsilon_{n+\ell})^2 + (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2} \quad (A.17)$$

であり、これは第一項を計算したときの、 $\xi\xi'$  の部分と同じになる。よって、ここで計算してきた  $\chi_{ij}^0(\mathbf{q}, i\omega_m)$  をまとめて書くと、

$$\begin{aligned}
 \chi_{ij}^0(\mathbf{q}, i\omega_m) &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \sigma_{\alpha\alpha'}^i \sigma_{\beta\beta'}^j \\
 &\times \sum_{\mathbf{k}} \left[ \left( \frac{\delta_{\alpha'\beta} \delta_{\beta'\alpha}}{2} + \frac{\delta_{\alpha'\beta} \delta_{\beta'\alpha} \xi\xi' - \Delta_{\alpha\beta}^* \Delta'_{\alpha'\beta'}}{2EE'} \right) \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \left( \frac{1}{E - E' + i\omega_m} + \frac{1}{E - E' - i\omega_m} \right) (f' - f) \\ & + \left( \frac{\delta_{\alpha'\beta}\delta_{\beta'\alpha}}{2} - \frac{\delta_{\alpha'\beta}\delta_{\beta'\alpha}\xi\xi' - \Delta_{\alpha\beta}^*\Delta_{\alpha'\beta'}}{2EE'} \right) (1 - f - f') \Big] \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

となり、式 (4.12) となる。そして  $i\omega_m \rightarrow \omega + i\Gamma$  と解析接続すると、式 (4.13)、(4.14) も導出できる。

## 参考文献

- [1] Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J. G. Bednorz and F. Lichtenberg, *Nature* **372**, 532 (1994).
- [2] 前野悦輝、出口和彦 日本物理学会誌 **56**, 817 (2001).
- [3] 桑原武 物性研究 物性研究刊行会 **74**, 509 (2000).
- [4] T. M. Rice, *Nature* **396**, 621 (1998).
- [5] Y. Maeno, T. M. Rice and M. Sigrist, *Phys. Today* **54**, No. 1 (2001).
- [6] 斯波弘行 「固体の電子論」 丸善, (1996).
- [7] T. M. Rice and M. Sigrist, *J. Phys. Condens. Matter* **7**, L643 (1995).
- [8] K. Ishida, H. Mukuda, Y. Kitaoka, K. Asayama, Z. Q. Mao, Y. Mori, Y. Maeno, *Nature* **396**, 658 (1998).
- [9] J. A. Duffy, S. M. Hayden, Y. Maeno, Z. Mao, J. Kulda, and G. J. McIntyre, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5412 (2000).
- [10] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 331 (1975).
- [11] M. Sigrist and K. Ueda, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 239 (1991).
- [12] G. R. Stewart, Z. Fisk, J. O. Willis and J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 679 (1984).
- [13] S. S. Saxena, P. Agarwal, K. Ahilan, F. M. Grosche, R. K. W. Haselwimmer, M. J. Steiner, E. Pugh, I. R. Walker, S. R. Julian, P. Monthoux, G. G. Lonzarich, A. Huxley, I. Sheikin, D. Braithwaite and J. Flouquet, *Nature* **406**, 587 (2000).



- [14] D. Aoki, A. Huxley, E. Ressouche, D. Braithwaite, J. Flouquet, J. P. Brison, E. Lhotel and C. Paulsen, *Nature* **413**, 613 (2001).
- [15] I. J. Lee, S. E. Brown, W. G. Clark, M. J. Stronse, M. J. Naughton, W. Kang and P. M. Chaikin, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 017004 (2002).
- [16] G. M. Luke, Y. Fudamoto, K. M. Kojima, M. I. Larkin, J. Merrin, B. Nachumi, Y. J. Uemura, Y. Maeno, Z. Q. Mao, Y. Mori, H. Nakamura and M. Sigrist, *Nature* **394**, 558(1998).
- [17] S. Nishizaki, Y. Maeno and Z.Q. Mao, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 572 (2000).
- [18] M. A. Tanatar, S. Nagai, Z. Q. Mao, Y. Maeno and T. Ishiguro, *Phys. Rev. B* **63**, 064505 (2001).
- [19] C. Lupien, W. A. MacFarlane, C. Proust, L. Taillefer, Z. Q. Mao and Y. Maeno, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5986 (2001).
- [20] K. Machida, M. Ozaki and T. Ohmi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 3720 (1996).
- [21] K. Miyake and O. Narikiyo, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1423 (1999).
- [22] M. Sigrist and M. E. Zhitomirsky, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 3452 (1996).
- [23] K. Izawa, H. Takahashi, H. Yamaguchi, Y. Matsuda, M. Suzuki, T. Sasaki, T. Fukase, Y. Yoshida, R. Settai, and Y. Onuki, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2653 (2001).
- [24] Y. Hasegawa, K. Machida and M. Ozaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 336 (2000).
- [25] M. Yakiyama and Y. Hasegawa, *Phys. Rev. B* **67**, 014512 (2003).
- [26] A. P. Mackenzie, S. R. Julian, A. J. Diver, G. J. McMullan, M. P. Ray, G. G. Lonzarich, Y. Maeno, S. Nishizaki and T. Fujita, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3786 (1996).
- [27] M. E. Zhitomirsky and T.M. Rice, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 057001 (2001).
- [28] T. Nomura and K. Yamada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71**, 404 (2002).
- [29] T. Nomura and K. Yamada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 3678 (2000).
- [30] 野村拓司 物性研究 物性研究刊行会 **79**, 663 (2003).
- [31] M. Sato and M. Kohmoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 3505 (2000).

- [32] T. Kuwabara and M. Ogata, Phys. Rev. Lett. **85**, 4586 (2000).
- [33] T. Takimoto, Phys. Rev. B **62**, R14641 (2000).
- [34] H. Shul, T. Matthias, and L. R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).
- [35] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, J. Akimitsu, Nature **410**, 63 (2001).
- [36] F. Bouquet, I. Sheikin, T. Plackowski, A. Junod, S. Lee and S. Tajima, Phys. Rev. Lett. **89**, 257001 (2002).
- [37] S. W. Lovesey, “Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter”, Oxford University Press, (1984).
- [38] M. Braden, O. Friedt, Y. Sidis, P. Bourges, M. Minakata and Y. Maeno, Phys. Rev. Lett. **88**, 197002 (2002).
- [39] Y. Sidis, M. Braden, P. Bourges, B. Hennion, S. Nishizaki, Y. Maeno and Y. Mori, Phys. Rev. Lett. **83**, 3320 (1999).